

UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

ESCUELA POLITÉCNICA SUPERIOR



GRADO EN INGENIERÍA EN TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES

2017 - 2018

TRABAJO DE FIN DE GRADO

ESTUDIO FLUIDODINÁMICO DE BATERÍAS DE FLUJO SIN MEMBRANA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA TÉRMICA Y FLUIDOS

AUTOR: Víctor Ríos Rebollo

TUTOR: Mario Sánchez Sanz

Febrero 2018



Esta obra se encuentra sujeta a la licencia Creative Commons **Reconocimiento – No Comercial – Sin Obra Derivada**



RESUMEN DEL PROYECTO

En este proyecto se hará un estudio fluidodinámico de una batería de flujo sin membrana para optimizar su rendimiento. En esta batería tendremos dos flujos inmiscibles que se juntan formando una interfase. El objetivo es ver cómo varía la interfase y el perfil de velocidades en función de la relación de viscosidades y el número de Reynolds de ambos fluidos.

En una primera fase haremos un análisis de las ecuaciones que gobiernan el sistema y hallaremos una solución teórica para la salida del conducto. En una segunda parte realizaremos una simulación con el programa FreeFem++. La batería está pensada para números de Reynolds bajos así que haremos varias simulaciones para distintos Reynolds. Se compararán ambas soluciones obtenidas y veremos a partir de qué Reynolds la solución de FreeFem++ deja de corresponderse con la teórica.

ÍNDICE

1	INTRODUCCIÓN	8
1.1	BATERÍAS DE FLUJO ACTUALES	8
1.2	BATERÍAS DE FLUJO SIN MEMBRANA	11
2	FORMULACIÓN DEL PROBLEMA	14
2.1	INTRODUCCIÓN.....	14
2.2	ECUACIONES.....	15
2.3	CONDICIONES DE CONTORNO EN $X=0$	18
2.4	CONDICIONES DE CONTORNO EN $X = \infty$	22
3	SOLUCIÓN PARA $X = \infty$	27
3.1	FUNCIÓN <i>velocity</i>	27
3.2	FUNCIÓN <i>interface</i>	30
3.3	FUNCIÓN <i>pressure</i>	32
4	SIMULACIÓN DEL PROBLEMA CON FREEFEM++	34
5	RESULTADOS CON FREEFEM++.....	37
6	CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS	43
7	BIBLIOGRAFÍA	44
8	CRONOGRAMA	45
9	PRESUPUESTO	46
10	ANEXOS.....	47
10.1	ANEXO 1. FUNCIONES EN MATLAB	47
10.1.1	FUNCIÓN <i>velocity</i>	47
10.1.2	FUNCIÓN <i>interface</i>	48
10.1.3	FUNCIÓN <i>pressure</i>	49



10.1.4	FUNCIÓN <i>freefem</i>	50
10.2	ANEXO 2. CÓDIGO FREEFEM++	52
10.2.1	ARCHIVO <i>batteries_convectCHNS</i>	52
10.2.2	ARCHIVO <i>savingfiles_nonsim</i>	58
10.2.3	ARCHIVO <i>parameters</i>	60

ÍNDICE DE FIGURAS

Ilustración 1: Esquema de una batería de flujo [2]	9
Ilustración 2: Concepto de electrolitos inmiscibles [4]	12
Ilustración 3: Esquema de una batería de flujo sin membrana [4]	13
Ilustración 4: Geometría de la batería	14
Ilustración 5: α = velocity (1,1)	27
Ilustración 6: α = velocity (1,0.5)	28
Ilustración 7: α = velocity (1,0.1)	29
Ilustración 8: interface para varias relaciones de viscosidades	31
Ilustración 9: pressure para varias relaciones de viscosidades.....	33
Ilustración 10: Mallado en FreeFem++	35
Ilustración 11: freefem (0.1,0.1,10,1)	37
Ilustración 12: freefem (0.1,0.1,1500,0.5)	38
Ilustración 13: freefem (0.1,0.4,10,0.1)	39
Ilustración 14: Reynolds crítico en función de la relación de viscosidades	41



ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Simulaciones en FreeFem++ para $dh = 0.1$ y $L0 = 0.1$	40
Tabla 2: Simulaciones en FreeFem++ para $dh = 0.4$ y $L0 = 0.1$	41
Tabla 3: Simulaciones en FreeFem++ para $dh = 0.1$ y $L0 = 0.4$	42
Tabla 4: Cronograma del proyecto.....	45
Tabla 5: Presupuesto del proyecto.....	46

1 INTRODUCCIÓN

Hoy en día las energías renovables están cobrando gran importancia. Son un buen sustituto a los combustibles fósiles y serán clave en el futuro. Pero aún queda mucho por investigar en estas tecnologías. El principal problema es que no podemos disponer de ellas cuando queramos debido a que están condicionadas a los factores ambientales. Una solución a este problema es almacenar la energía cuando las condiciones son favorables y usarla más tarde.

Las baterías actuales no permiten almacenar grandes cantidades de energía y tienen muchas desventajas, así que este es un campo en el que hay que investigar si se quiere potenciar el uso de energías renovables.

En este proyecto apostaremos por las baterías de flujo, y más concretamente por las de flujo sin membrana, que es un diseño que no se ha estudiado mucho aún.

1.1 BATERÍAS DE FLUJO ACTUALES

Una batería de flujo es un sistema de almacenamiento de energía eléctrica que convierte energía química directamente en energía eléctrica usando diferentes formas iónicas de un electrolito.

Los dos electrolitos circulan en dos flujos diferentes que salen desde dos tanques de almacenamiento. La célula está dividida en dos partes por una membrana. Cada parte de la célula tiene en su extremo un electrodo, normalmente hecho de grafito. La reacción química tiene lugar en los electrodos.

Es un proceso reversible en el que los dos electrolitos ricos en iones conductores intercambian iones a través de una membrana de intercambio iónico en la célula de la batería.

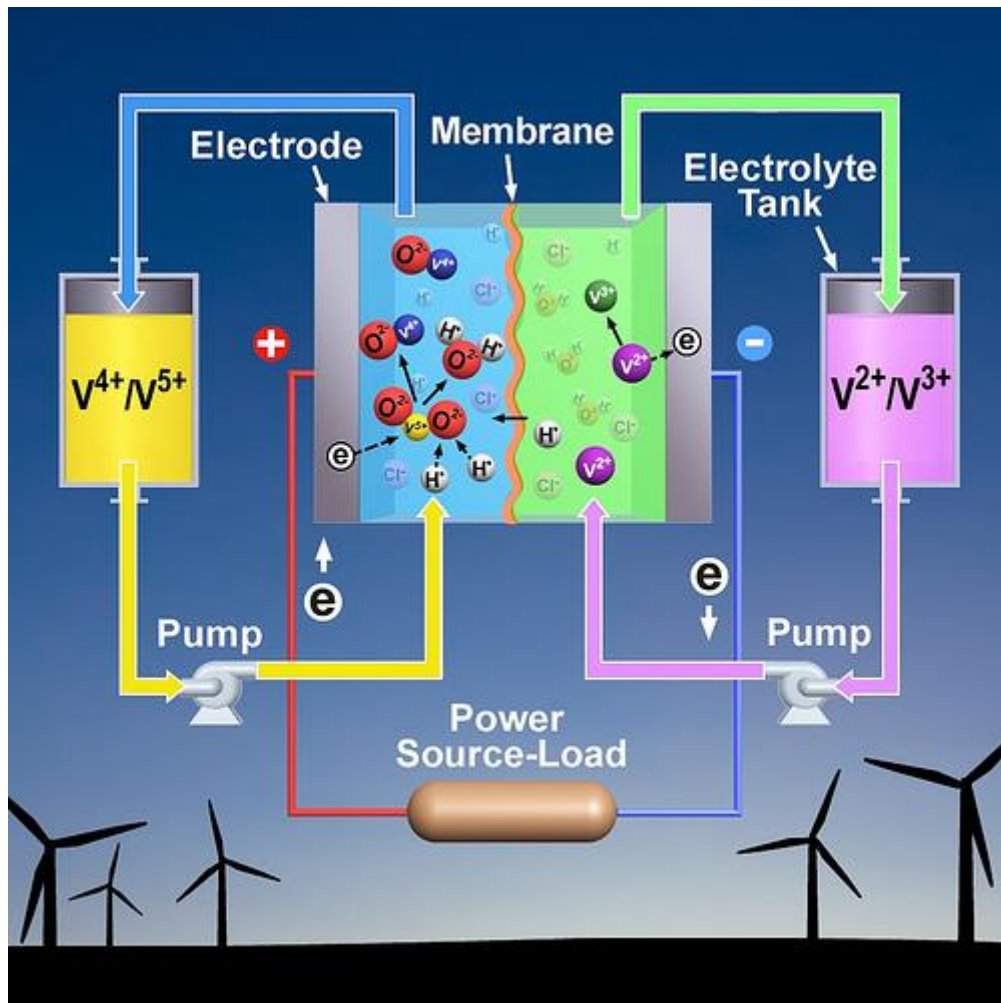


Ilustración 1: Esquema de una batería de flujo [2]

La energía es almacenada y liberada por medio de una reacción electroquímica, que ocurre cuando los electrolitos fluyen a través de la célula. Al pasar por la membrana, se reduce una solución mientras que la otra se oxida creando una corriente eléctrica utilizable. Este proceso se conoce como "redox", que significa: reducción = absorción de electrones, oxidación = emisión de electrones. La corriente eléctrica se recoge mediante electrodos y se pone a disposición de un circuito externo.

Una batería de flujo redox se carga como una batería, excepto que la energía se almacena químicamente en un "fluido de trabajo" en lugar de físicamente en un electrodo como con las tecnologías de baterías convencionales.

La batería de flujo más importante actualmente es la batería de flujo Redox de Vanadio o VRB por sus siglas en inglés (Vanadium Redox Flow Battery). Consiste en dos tanques de plástico llenos de diferentes formas iónicas de vanadio en una solución de ácido sulfúrico suave que sirve como el electrolito. El electrolito en las semicélulas positivas contiene iones V^{5+} y V^{4+} , el electrolito en las semicélulas negativas, iones V^{3+} y V^{2+} . Cuando se descarga la batería de vanadio, los iones V^{5+} en la media célula positiva se convierten en iones V^{4+} cuando los electrones se alimentan al terminal positivo de la batería. De forma similar, en la semicélula negativa, se eliminan los electrones convirtiendo los iones V^{2+} en V^{3+} dando como resultado un voltaje en circuito abierto típico de 1,41 V a 25 °C. Durante la carga este proceso se invierte. La reacción es reversible y casi infinitamente repetible, permitiendo que la batería sea cargada, descargada y recargada. El electrolito adicional se almacena externamente, generalmente en tanques, y normalmente se bombea a través de la célula (o células) del reactor. Las baterías de flujo se pueden "recargar" rápidamente reemplazando el líquido electrolítico (de manera similar al relleno de los tanques de combustible) mientras que simultáneamente se recupera el material gastado para la re-energización.

Ventajas

- Las baterías de flujo son los únicos dispositivos de almacenamiento electroquímicos para los cuales la cantidad de energía y la potencia pueden escalarse independientemente entre sí.
 - La capacidad de almacenamiento está limitada únicamente por el tamaño de los tanques de almacenamiento.
 - Los tanques se pueden llenar manualmente cargando así la batería.
 - Al intercambiar los fluidos electrolíticos, éstos pueden cargarse y descargarse en baterías separadas.
 - No toda la batería, sino solamente el portador de energía debe ser intercambiado entre la estación de carga y descarga. Esto es muy interesante para aplicaciones móviles.
- Rango de salida de 50 kW a 10.000 kW con cuatro a diez horas de almacenamiento.
- Se puede dejar que se descargue durante largos períodos de tiempo.
- Respuesta muy rápida al cambio de carga. Se ha logrado un cambio del 100% en menos de medio milisegundo. El factor limitante es el equipo eléctrico, no la batería.

- Capacidad de sobrecarga extremadamente grande de 400% durante diez segundos.
- Ciclo de combustible cerrado, por lo tanto tiene inmunidad con respecto a las fluctuaciones de los precios del combustible.
- Larga vida, las nuevas VRB están diseñadas para durar al menos 12 a 15 años. La solución de electrolito de vanadio dura infinitamente y se puede reciclar fácilmente en una batería nueva.
- Las pruebas han confirmado que la VRB es capaz de más de 10.000 cargas/descargas sin ningún deterioro en la eficiencia.
- Eficiencias en el rango de 65% a 96%.

Desventajas

- Altos costes iniciales (25% más que una batería de plomo equivalente), pero puede ser mitigado con un tamaño adecuado.
- Las membranas deben ser reemplazadas periódicamente.
- El vanadio es un elemento caro, tóxico y escaso. Además requiere reemplazo y eliminación.
- Es muy voluminosa, la cantidad de energía almacenada está determinada por la cantidad de electrolito disponible en las dos semicélulas. Los sistemas de alto rendimiento requieren un gran volumen de almacenamiento de electrolitos y un área de diseño significativo de hasta 2.000 m² en un edificio de dos pisos.

1.2 BATERÍAS DE FLUJO SIN MEMBRANA

La batería de flujo sin membrana tiene un principio similar a la de vanadio. Consiste en reemplazar el vanadio por moléculas redox orgánicas que son abundantes, de bajo coste y respetuosas con el medio ambiente. Esto soluciona los problemas que presentaba el vanadio.

Otra característica principal de los electrolitos es que son inmiscibles, por lo que no necesitaremos membrana ya que formarán un sistema bifásico cuya interfase funcionará como una barrera natural. Eliminar la membrana supondrá alargar la vida de la batería, mejorar el rendimiento y disminuir los costes, ya que la membrana

supone el 40% del coste de la batería, y recordemos que debe ser reemplazada periódicamente en las VRB.

Otros intentos de eliminar la membrana han sido mediante minimizar la mezcla de los electrolitos manteniendo un flujo laminar, lo cual limita sus aplicaciones a conductos muy pequeños. En nuestra batería la diferencia es que los electrolitos no se pueden mezclar, así que es un sistema muy versátil ya que no depende del régimen del flujo.

La siguiente figura es una representación esquemática del concepto de batería de flujo sin membrana basado en electrolitos redox inmiscibles donde la fase superior es el electrolito acuoso que actúa como el catolito y la fase inferior es el electrolito líquido iónico que es el anolito.

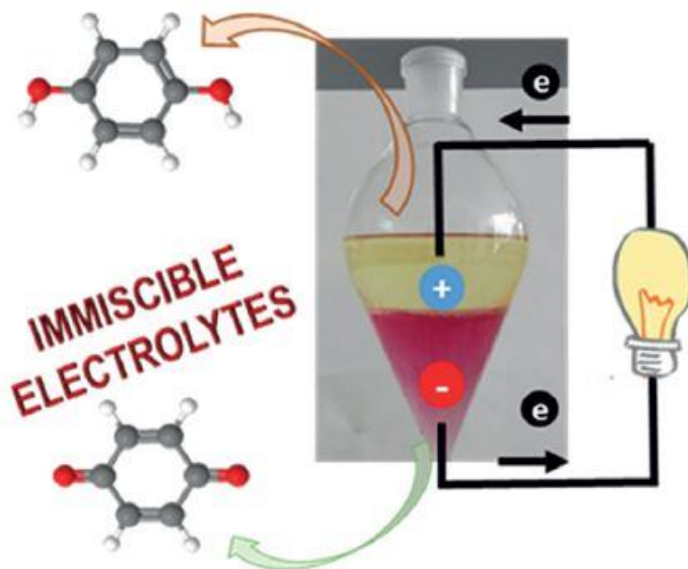


Ilustración 2: Concepto de electrolitos inmiscibles [4]

En esta otra imagen se puede ver un esquema de la batería de flujo sin membrana con un diseño horizontal para favorecer la formación de dos fases inmiscibles.

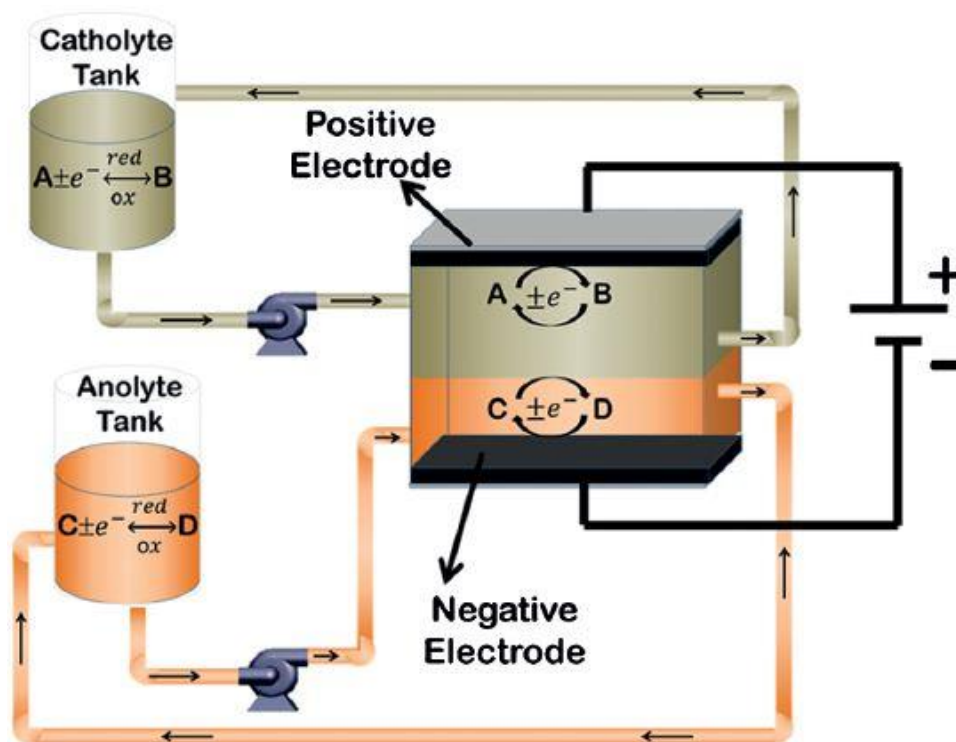


Ilustración 3: Esquema de una batería de flujo sin membrana [4]

Experimentos en los laboratorios de IMDEA Energía [4] han demostrado que la batería de flujo sin membrana funciona. Se ha conseguido un voltaje de 1'4 V en circuito abierto con una densidad de energía teórica de $22'5 \text{ WhL}^{-1}$, y es capaz de entregar el 90% de su capacidad teórica mostrando un excelente rendimiento a largo plazo (eficiencia coulombica del 100% y eficiencia energética del 70%).

Para poder optimizar estos resultados es necesario realizar un estudio fluidodinámico del sistema. El objetivo de este estudio es conocer la evolución de la interfase en función de los distintos parámetros del problema. Esto es lo que trataremos en los próximos capítulos.

2 FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

2.1 INTRODUCCIÓN

El problema consiste en dos fluidos inmiscibles que vienen de conductos diferentes y se juntan en la célula formando una interfase. Hay que tener en cuenta que los dos flujos a la entrada llegan completamente desarrollados.

La entrada de la célula está conformada por el encuentro de ambos fluidos y consiste en un pequeño escalón de longitud L_0 y altura Δh . Llamaremos h_0 a la altura desde la pared inferior hasta el escalón.

La célula tiene una longitud L . La altura del conducto vendrá determinada por el parámetro H y la posición de la interfase por el parámetro adimensional α , siendo αH el espacio que ocupa el fluido 1 y $(1 - \alpha)H$ el que ocupa el fluido 2.

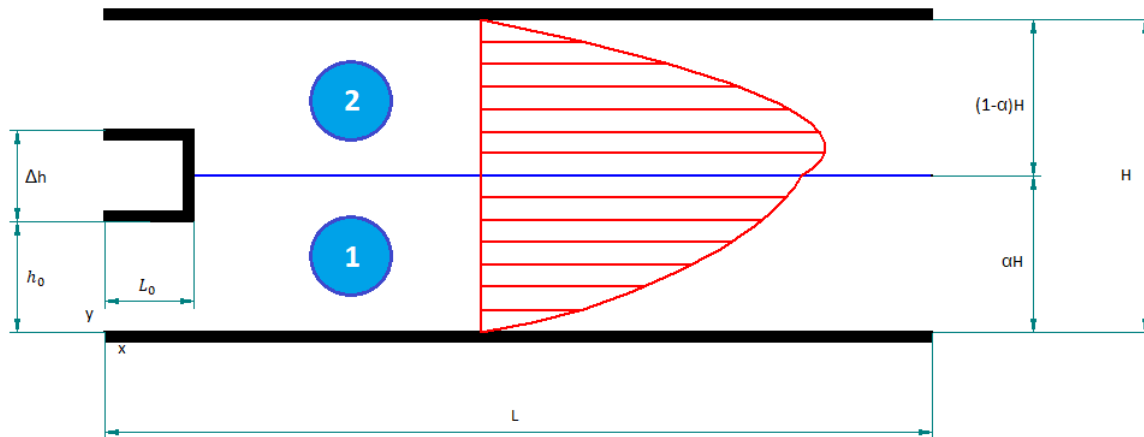


Ilustración 4: Geometría de la batería

2.2 ECUACIONES

Vamos a analizar las ecuaciones que gobiernan nuestro sistema. Empezamos por la ecuación de continuidad.

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0$$

Seguimos con las ecuaciones de Navier-Stokes que analizaremos para ambos ejes.

Eje x

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right] + \rho f_{m_x}$$

- La velocidad en x no depende del tiempo, así que $\frac{\partial v_x}{\partial t} = 0$.
- No existen fuerzas másicas en la dirección x por lo que $f_{m_x} = 0$.

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right]$$

Eje y

$$\rho \left(\frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right] + \rho f_{m_y}$$

- Se eliminan los mismos términos que en el eje x por los mismos motivos.

- La fuerza másica en la dirección y sería la gravedad, pero se desprecia ya que estamos trabajando en un conducto muy fino.

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_y}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} \right) = - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left[\frac{\partial^2 v_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_y}{\partial y^2} \right]$$

A continuación se realizan los siguientes cambios de variable para trabajar con parámetros adimensionales.

- Adimensionalizamos las coordenadas con la longitud y la altura del conducto respectivamente para que estén comprendidas entre 0 y 1.

$$x' = \frac{x}{L} \qquad y' = \frac{y}{H}$$

- Para escalar la velocidad y la presión usaremos la velocidad media del fluido 1, $\bar{u}_1 = \frac{Q_1}{h_0}$.

$$v'_x = \frac{v_x}{\bar{u}_1} \qquad v'_y = \frac{v_y}{\bar{u}_1 \frac{H}{L}}$$

$$\Delta p' = \frac{\Delta p}{\mu_1 \frac{\bar{u}_1}{h_0 H} L}$$

- Expresaremos la relación de densidades como $\rho' = \frac{\rho_2}{\rho_1}$.

Fluido 1

$$Re_1 \frac{h}{L} \left(v'_x \frac{\partial v'_x}{\partial x'} + v'_y \frac{\partial v'_x}{\partial y'} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial x'} + \frac{h_0}{H} \left[\left(\frac{H}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 v'_x}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 v'_x}{\partial y'^2} \right]$$

$$Re_1 \left(\frac{h}{L} \right)^3 \left(v'_x \frac{\partial v'_y}{\partial x'} + v'_y \frac{\partial v'_y}{\partial y'} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial y'} + \frac{h_0}{H} \left[\left(\frac{H}{L} \right)^4 \frac{\partial^2 v'_y}{\partial x'^2} + \left(\frac{H}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 v'_y}{\partial y'^2} \right]$$

$$\frac{\partial v'_x}{\partial x'} + \frac{\partial v'_y}{\partial y'} = 0$$

Fluido 2

$$\rho' Re_1 \frac{h}{L} \left(v'_x \frac{\partial v'_x}{\partial x'} + v'_y \frac{\partial v'_x}{\partial y'} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial x'} + \frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{h_0}{H} \left[\left(\frac{H}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 v'_x}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2 v'_x}{\partial y'^2} \right]$$

$$\rho' Re_1 \left(\frac{h}{L} \right)^3 \left(v'_x \frac{\partial v'_y}{\partial x'} + v'_y \frac{\partial v'_y}{\partial y'} \right) = -\frac{\partial p'}{\partial y'} + \frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{h_0}{H} \left[\left(\frac{H}{L} \right)^4 \frac{\partial^2 v'_y}{\partial x'^2} + \left(\frac{H}{L} \right)^2 \frac{\partial^2 v'_y}{\partial y'^2} \right]$$

$$\frac{\partial v'_x}{\partial x'} + \frac{\partial v'_y}{\partial y'} = 0$$

Donde:

$$Re_1 = \frac{\rho_1 \bar{u}_1 h_0}{\mu_1} = \frac{\rho_1 Q_1}{\mu_1}$$

2.3 CONDICIONES DE CONTORNO EN $x=0$

En esta parte del problema analizaremos los fluidos antes del final del escalón, es decir, desde $x = 0$ hasta $x = L_0$. Se particularizan las ecuaciones de Navier-Stokes para este caso.

- La velocidad en el eje x no depende de la variable x puesto que se parte de la suposición de que el flujo está completamente desarrollado en velocidades cuando entra en el conducto, por lo tanto $\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0$.
- No hay velocidad en el eje y por lo que $v_y = 0$.

Finalmente queda:

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2}$$

En el caso del fluido que circula por el conducto inferior:

$$v_{x_1} = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} y^2 + C_1' y + C_2'$$

Se aplican las condiciones de contorno en las paredes para hallar las constantes.

$$v_{x_1}(y = 0) = 0$$

$$v_{x_1}(y = h_0) = 0$$

$$C_1^I = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} h_0$$

$$C_2^I = 0$$

Por lo que la expresión final de la velocidad queda:

$$v_{x_1} = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} h_0^2 \left[\frac{y}{h_0} - \left(\frac{y}{h_0} \right)^2 \right]$$

En el caso del fluido que circula por el conducto superior:

$$v_{x_2} = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} y^2 + C_1^{II} y + C_2^{II}$$

Se aplican de nuevo las condiciones de contorno en las paredes para hallar las constantes.

$$v_{x_2}(y = h_0 + \Delta h) = 0$$

$$v_{x_2}(y = H) = 0$$

$$C_1^{II} = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \left(\frac{H^2 - (h_0 + \Delta h)^2}{h_0 + \Delta h - H} \right)$$

$$C_2^{II} = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} H \left[H + \frac{H^2 - (h_0 + \Delta h)^2}{h_0 + \Delta h - H} \right]$$

Finalmente la velocidad queda:

$$v_{x_2} = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} H^2 \left[-\left(\frac{y}{H}\right)^2 + (1+h)\frac{y}{H} - h \right]$$

Donde:

$$h = \frac{h_0 + \Delta h}{H}$$

Para hallar los caudales, se integran las velocidades entre sus correspondientes límites.

$$Q_1 = \int_0^{h_0} v_{x_1} dy$$

$$Q_2 = \int_{h_0+\Delta h}^H v_{x_2} dy$$

Tras integrar se obtiene:

$$Q_1 = -\frac{h_0^3}{12\mu_1} \frac{\partial p}{\partial x}$$

$$Q_2 = -\frac{H^3}{12\mu_2} \frac{\partial p}{\partial x} [1 - h^3 - 3h(1-h)]$$

Usamos los parámetros \bar{u}_1 e y' para adimensionalizar las ecuaciones de la velocidad del mismo modo que hicimos anteriormente.

$$y' = \frac{y}{H}$$

$$\bar{u}_1 = \frac{Q_1}{h_0}$$

$$v'_{x_1} = \frac{v_{x_1}}{\bar{u}_1} = \frac{6H}{h_0} \left(y' - \frac{Hy'^2}{h_0} \right)$$

$$v'_{x_2} = \frac{v_{x_2}}{\bar{u}_1} = \frac{6h_0}{H(1-h)^3} \frac{Q_2}{Q_1} [-y'^2 + (1+h)y' - h]$$

2.4 CONDICIONES DE CONTORNO EN $x = \infty$

Se particularizarán las ecuaciones para un punto lo suficientemente alejado de la entrada como para que no tengamos velocidad en el eje y y el perfil de velocidades del fluido sea constante en el eje x , es decir, el flujo esté completamente desarrollado.

- La velocidad en el eje x no depende de la variable x puesto que estamos en un punto lo suficientemente lejos de la entrada y el flujo está completamente desarrollado en velocidades, por lo tanto $\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0$.
- No hay velocidad en el eje y por lo que $v_y = 0$.

Finalmente queda:

$$\frac{d\tau_{yx}}{dy} = \frac{\Delta p}{L}$$

Donde τ es el esfuerzo cortante y $\frac{\Delta p}{L} = \frac{\partial p}{\partial x}$ es el gradiente de presiones.

Particularizamos para cada fluido e integramos en la ecuación anterior:

$$\tau_{yx}^I = \frac{\Delta p}{L} y + C_1^I$$

$$\tau_{yx}^{II} = \frac{\Delta p}{L} y + C_2^{II}$$

En la interfase, para $y = \alpha H$, $\tau_{yx}^I = \tau_{yx}^{II} \Rightarrow C_1^I = C_2^{II} = C_1$.

Por la ley de viscosidad de Newton:

$$\tau_{yx} = -\mu \frac{dv_x}{dy}$$

Sustituimos en las ecuaciones obtenidas anteriormente.

$$-\mu_1 \frac{dv_{x_1}}{dy} = \frac{\Delta p}{L} y + C_1$$

$$-\mu_2 \frac{dv_{x_2}}{dy} = \frac{\Delta p}{L} y + C_1$$

Tras integrar se obtienen los perfiles de velocidades para ambos fluidos.

$$v_{x_1} = -\frac{\Delta p}{2\mu_1 L} y^2 - \frac{C_1}{\mu_1} y + C_2^I$$

$$v_{x_2} = -\frac{\Delta p}{2\mu_2 L} y^2 - \frac{C_1}{\mu_2} y + C_2^{II}$$

Se aplican las condiciones de contorno en las paredes y la interfase para hallar las constantes.

$$v_{x_1}(0) = 0$$

$$v_{x_2}(H) = 0$$

$$v_{x_1}(\alpha H) = v_{x_2}(\alpha H)$$

$$C_1 = -\frac{H\Delta p}{2L} \frac{\mu_2 \alpha^2 + \mu_1(1 - \alpha^2)}{\alpha\mu_2 + (1 - \alpha)\mu_1}$$

$$C_2^I = 0$$

$$C_2^{II} = \frac{H^2\Delta p}{2\mu_2 L} \frac{\mu_2 \alpha(1 - \alpha) + \mu_1 \alpha(\alpha - 1)}{\alpha\mu_2 + (1 - \alpha)\mu_1}$$

Por último, se expresa la función velocidad como una función a trozos de la siguiente forma:

$$v = \begin{cases} v_{x_1} & \text{si } 0 \leq y \leq \alpha H \\ v_{x_2} & \text{si } \alpha H < y \leq H \end{cases}$$

Para hallar los caudales hay que integrar las velocidades entre sus límites correspondientes.

$$Q_1 = \int_0^{\alpha H} v_{x_1} dy$$

$$Q_2 = \int_{\alpha H}^H v_{x_2} dy$$

El resultado final es el siguiente:

$$Q_1 = -\frac{\Delta p}{6\mu_1 L} (\alpha H)^3 - \frac{C_1}{2\mu_1} (\alpha H)^2$$

$$Q_2 = -\frac{H^3 \Delta p}{6\mu_2 L}(1 - \alpha^3) - \frac{H^2 C_1}{2\mu_2}(1 - \alpha^2) + HC_2^H(1 - \alpha)$$

Se adimensionalizarán las ecuaciones añadiendo los parámetros adimensionales $k = \frac{Q_2}{Q_1}$, $q = \frac{\mu_2}{\mu_1}$ y $\gamma = \frac{H^3 \Delta p}{L\mu_1 Q_1}$. Tras una serie de cálculos se llega a las siguientes expresiones:

$$k = \frac{(1 - q)\alpha^4 + 2(3q - 2)\alpha^3 + 3(2 - 3q)\alpha^2 + 4(q - 1)\alpha + 1}{q(q - 1)\alpha^4 - 2q\alpha^3 + 3q\alpha^2}$$

$$\gamma = \left(-\frac{\alpha^3}{6} + \frac{q\alpha^4 - \alpha^2(1 - \alpha)^2}{4(q\alpha + 1 - \alpha)} + \frac{\alpha^2(1 - \alpha)}{2(q\alpha + 1 - \alpha)} \right)^{-1}$$

Se puede ver cómo en ambas ecuaciones han quedado unas expresiones que sólo dependen de la posición de la interfase y la relación de viscosidades, el resto de parámetros se han anulado por el camino. Por lo tanto estas dos ecuaciones van a ser claves para nuestro estudio.

Para adimensionalizar el perfil de velocidades se introducirán los parámetros $y' = \frac{y}{H}$, $u_{x_1} = \frac{v_{x_1}}{Q_1/\alpha H}$ y $u_{x_2} = \frac{v_{x_2}}{Q_1/\alpha H}$. Finalmente queda:

$$u_{x_1} = \frac{-y'^2 + \frac{q\alpha^2 + (1 - \alpha^2)}{q\alpha + (1 - \alpha)}y'}{-\frac{\alpha^2}{3} + \frac{\alpha}{2} \frac{q\alpha^2 + (1 - \alpha^2)}{q\alpha + (1 - \alpha)}}$$

$$u_{x_2} = \frac{1}{q} \left(\frac{-y'^2 + \frac{q\alpha^2 + (1-\alpha^2)}{q\alpha + (1-\alpha)} y' + \frac{q\alpha(1-\alpha) + \alpha(\alpha-1)}{q\alpha + (1-\alpha)}}{-\frac{\alpha^2}{3} + \frac{\alpha}{2} \frac{q\alpha^2 + (1-\alpha^2)}{q\alpha + (1-\alpha)}} \right)$$

$$u = \begin{cases} u_{x_1} & \text{si } 0 \leq y' \leq \alpha \\ u_{x_2} & \text{si } \alpha < y' \leq 1 \end{cases}$$

3 SOLUCIÓN PARA $X = \infty$

Se realizará un análisis de las ecuaciones anteriores con MATLAB. Todos los códigos de las siguientes funciones se encuentran en el anexo de este proyecto.

3.1 FUNCIÓN *velocity*

A continuación se muestran unos ejemplos de una función en MATLAB que calcula la posición de la interfase y dibuja la gráfica del perfil de velocidades. Para ello hay que meter los parámetros k y q como inputs de la función.

```
>> alpha = velocity (1,1)

alpha =

    0.5000
```

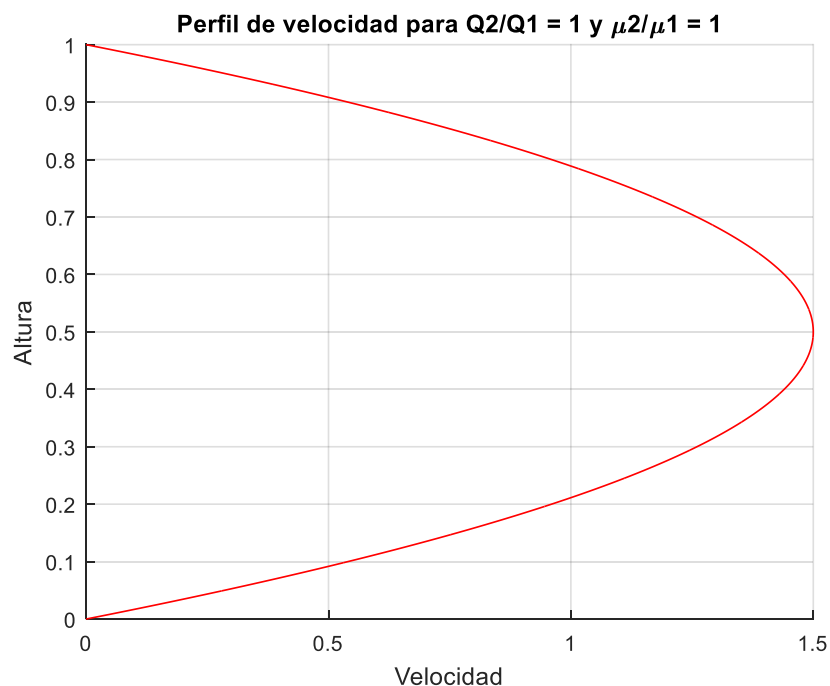


Ilustración 5: $\alpha = \text{velocity}(1,1)$

Este es el ejemplo más sencillo. Los dos fluidos tienen las mismas características y se puede considerar como si fuera uno solo. La velocidad máxima se alcanza en la interfase y se forma un flujo de Poiseuille perfecto.

Se puede ver cómo se cumplen las condiciones de contorno descritas en el capítulo 2. La velocidad es 0 en las paredes (para $y = 0$ e $y = 1$) y la velocidad es la misma para ambos fluidos en la interfase.

```
>> alpha = velocity (1,0.5)  
  
alpha =  
  
0.5295
```

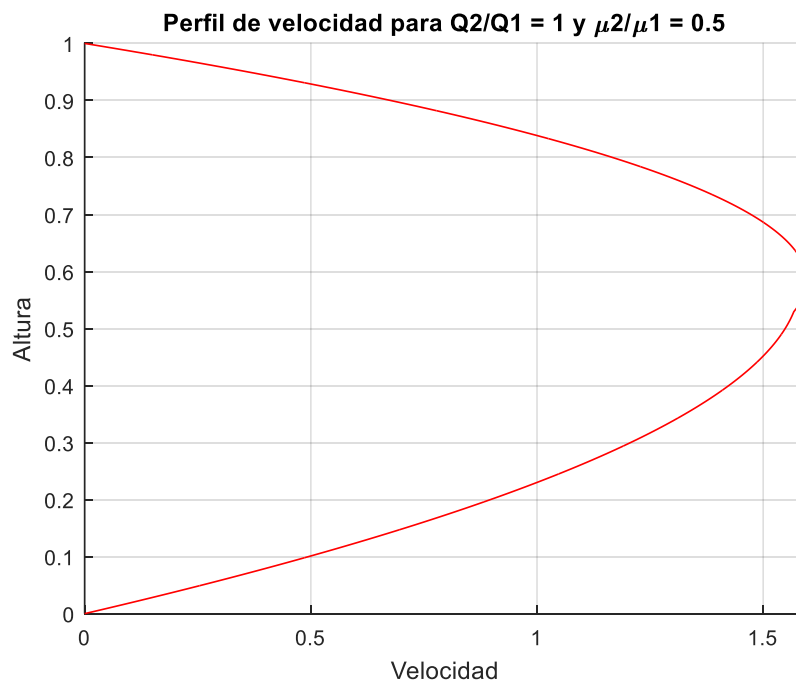


Ilustración 6: $\alpha = \text{velocity}(1,0.5)$

```
>> alpha = velocity (1,0.1)
```

```
alpha =
```

```
0.6120
```

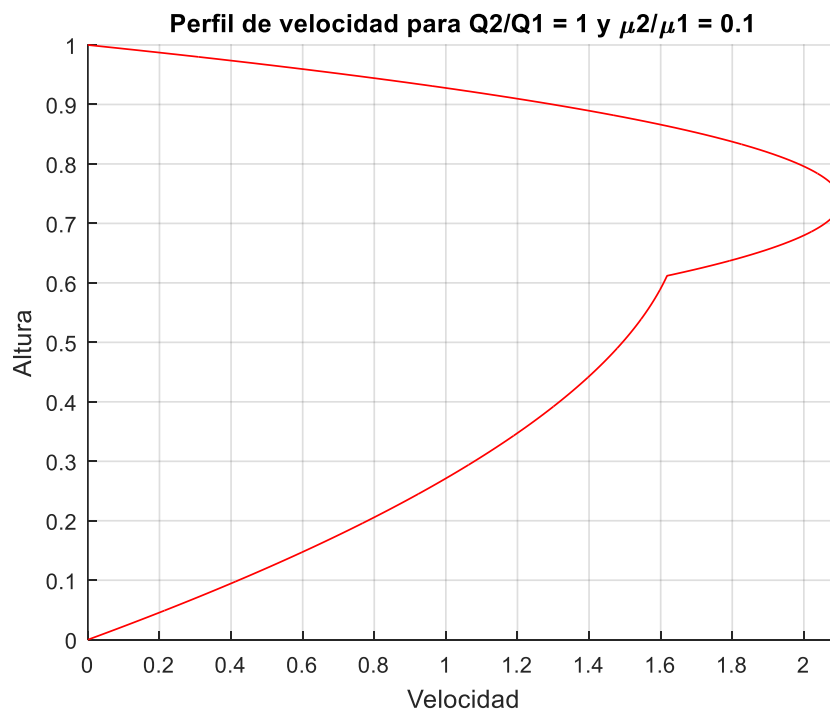


Ilustración 7: $\alpha = \text{velocity}(1,0.1)$

Se puede ver que la velocidad es mayor en el fluido de menor viscosidad, lo cual se corresponde con las formulas anteriores ya que habíamos visto que la velocidad es inversamente proporcional a la viscosidad del fluido.

3.2 FUNCIÓN *interface*

La siguiente función es una función polimórfica, es decir, realiza unas operaciones u otras dependiendo del número de inputs. El programa trabaja básicamente con la ecuación adimensional de la relación de caudales hallada anteriormente.

- Si añadimos dos inputs, serán leídos como “q” y “ α ”, por ese orden, y devolverá un único valor que será la relación de caudales “k”. A continuación se muestran unos ejemplos:

```
>> k = interface(0.3,0.6)
```

```
k =
```

```
2.8448
```

```
>> k = interface(5,0.3)
```

```
k =
```

```
0.1201
```

- Si metemos un único input éste será leído como la relación de viscosidades “q” y devolverá una gráfica de la posición de la interfase “ α ” frente a la relación de caudales “k”. En el siguiente gráfico se resumen algunos resultados.

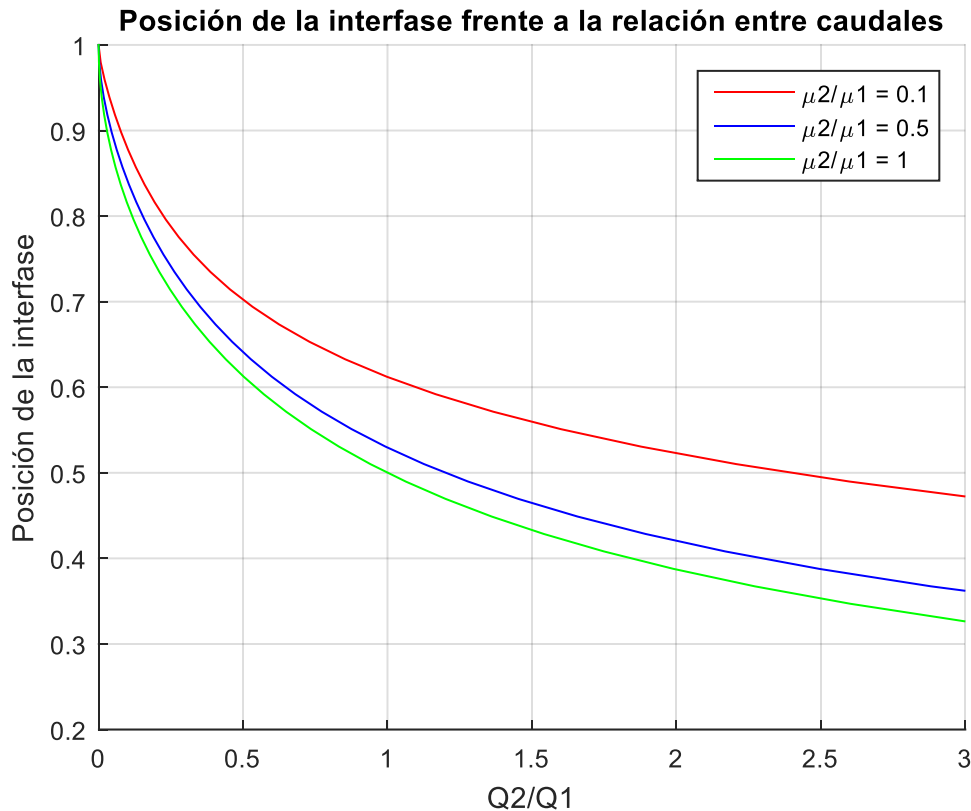


Ilustración 8: interfase para varias relaciones de viscosidades

Todas las funciones empiezan desde el punto (0,1) ya que si $Q_2/Q_1 = 0 \Rightarrow Q_2 = 0$ por lo que solamente tendremos fluido 1 y no existirá interfase, que es lo mismo que decir que la interfase estará situada en $y = 1$ (posición de la pared superior)

Se puede ver que la posición de la interfase tiende a 0 conforme la relación de caudales se aproxima a infinito. Esto se debe a que si $Q_2/Q_1 = \infty \Rightarrow Q_1 = 0$ y tenemos el mismo caso de antes de ausencia de interfase, pero esta vez interpreta que la interfase está situada en $y = 0$ (posición de la pared inferior)

Por otro lado, la interfase tiende a 0 mucho más rápido conforme a mayores relaciones de viscosidad. Esto es debido a que el fluido más viscoso ocupará mayor espacio y desplazará al otro.

3.3 FUNCIÓN *pressure*

Esta función también es polimórfica y trabaja con la ecuación adimensional de la presión “ γ ” y la ecuación adimensional de la relación de caudales. Recordemos que γ tiene la siguiente expresión:

$$\gamma = \frac{H^3 \Delta p}{L \mu_1 Q_1} = \left(-\frac{\alpha^3}{6} + \frac{q\alpha^4 - \alpha^2(1-\alpha)^2}{4(q\alpha + 1 - \alpha)} + \frac{\alpha^2(1-\alpha)}{2(q\alpha + 1 - \alpha)} \right)^{-1}$$

- Si metemos dos inputs, serán leídos como “q” y “ α ” por ese orden y devolverá el valor de “ γ ”. Ejemplo:

```
>> y = pressure(2,0.4)
```

```
y =
```

```
28.3019
```

```
>> y = pressure(1.1,0.7)
```

```
y =
```

```
14.7425
```

- Si metemos un único input, será leído como “q” y devolverá una gráfica del parámetro adimensional “ γ ” frente a la relación de caudales “k”. En el siguiente gráfico se resumen algunos resultados.

Parámetro adimensional de la presión frente a la relación entre caudales

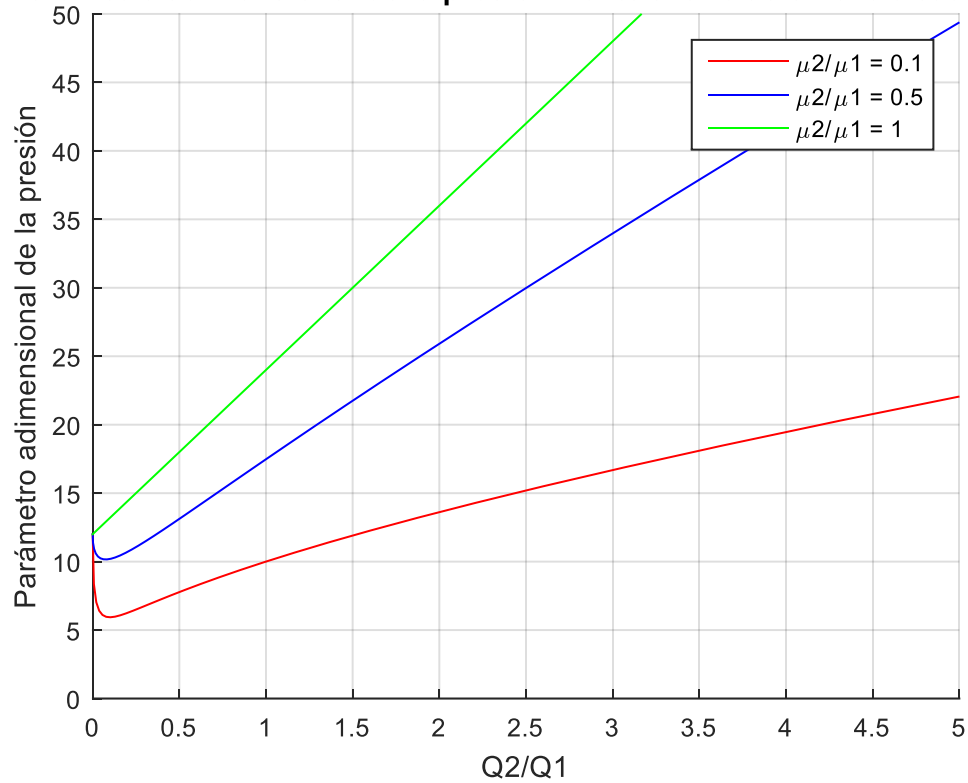


Ilustración 9: pressure para varias relaciones de viscosidades

Se puede ver que para grandes relaciones de caudales, el parámetro adimensional de la presión tiende a infinito. Esto se debe a que dicho parámetro ha sido adimensionalizado con Q_1 .

A partir de esta gráfica podremos saber qué presión aplicarle al fluido en función de la relación de caudales y la relación de viscosidades.

4 SIMULACIÓN DEL PROBLEMA CON FREEFEM++

Se usará el programa FreeFem++ para simular el movimiento del fluido dentro del conducto. FreeFem++ es un programa que resuelve ecuaciones diferenciales parciales por el método de elementos finitos. Es un software libre y trabaja en lenguaje C++.

El código que se ha creado realiza un mallado triangular sobre la geometría de nuestro conducto, este mallado tiene más puntos conforme nos acercamos a la interfase ya que ahí será necesaria una mayor precisión. Después trabaja con las ecuaciones que se han formulado en el capítulo 2 para simular el movimiento del fluido. Para tratar estas ecuaciones mediante álgebra, se usa la formulación débil para escribirlas en forma integral. La simulación se realiza utilizando el método de elementos finitos mediante aproximación de segundo orden en tiempo y segundo orden en espacio. Para hallar la posición de la interfase se usa la ecuación de Cahn-Hilliard.

El programa guarda un archivo de texto por cada iteración que hace. En estos archivos se puede ver la velocidad en cada punto y la posición de la interfase. Detendremos la iteración cuando el error sea del orden de 10^{-4} y no dependa del tiempo. Si llegamos a esa condición, significa que la interfase es estable.

Cada simulación tarda una media de 30h. En caso de que el programa supere las 48h y la interfase siga cambiando de posición, finalizamos la iteración y decimos que la interfase es inestable.

La siguiente imagen es un ejemplo de lo que devuelve el programa por pantalla, donde se puede apreciar el mallado del problema.

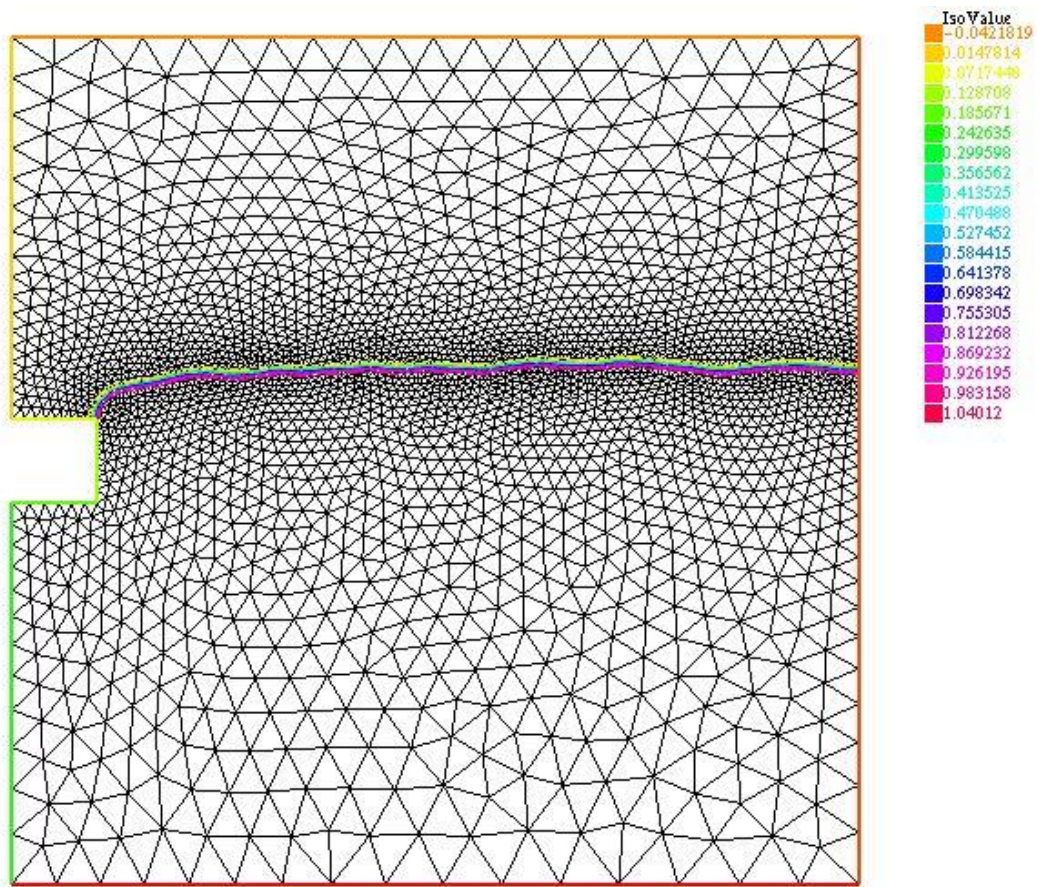


Ilustración 10: Mallado en FreeFem++

Se realizará la simulación con los parámetros que tendrá nuestra batería, los cuales se definen a continuación.

$$\frac{H}{L} = 0'01$$

$$h_0 = 0'5 - \frac{dh}{2}$$

$$L_0 = 0'1$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = 1$$

$$dh = 0'1$$

$$\frac{Q_2}{Q_1} = 1$$

Se simulará el problema para varias relaciones de viscosidades y varios Reynolds. A la relación de viscosidades le daremos valores de 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2 y 0.1. Al Reynolds le daremos valores de 10, 300, 600, 900, 1200 y 1500. Esto hace un total de 60 casos de estudio.

Además, veremos qué pasa en el caso de que se cambie la geometría de entrada. En un primer caso, aumentaremos la longitud del escalón de tal modo que $L_0 = 0.4$, fijaremos el Reynolds en 10 y daremos valores a la relación de viscosidades de 1, 0.7, 0.3 y 0.1. En un segundo caso, aumentaremos la altura del escalón de tal modo que $dh = 0.4$ con los mismos valores de Reynolds y relación de viscosidades que el primer caso. Esto hace un total de 8 casos de estudio más.

5 RESULTADOS CON FREEFEM++

Una vez realizadas las simulaciones, se meten los datos de la última iteración en una tabla de Excel. De este modo se pueden representar los datos con Matlab.

Se ha creado una función en Matlab llamada *freefem* que lee los datos del Excel. El objetivo es comparar la solución de FreeFem++ con la que se ha calculado en el capítulo 3. Para ello se verá si la posición de la interfase y la velocidad en $x = L$ corresponde con la teórica. De este modo, la función representará los datos del Excel y llamará a la función *velocity* del capítulo 3 para comparar ambas soluciones. Esta función tiene 4 inputs que son dh , L_0 , Re y μ_2/μ_1 , por ese orden. A continuación se muestran algunos resultados.

```
>> freefem(0.1,0.1,10,1)
```

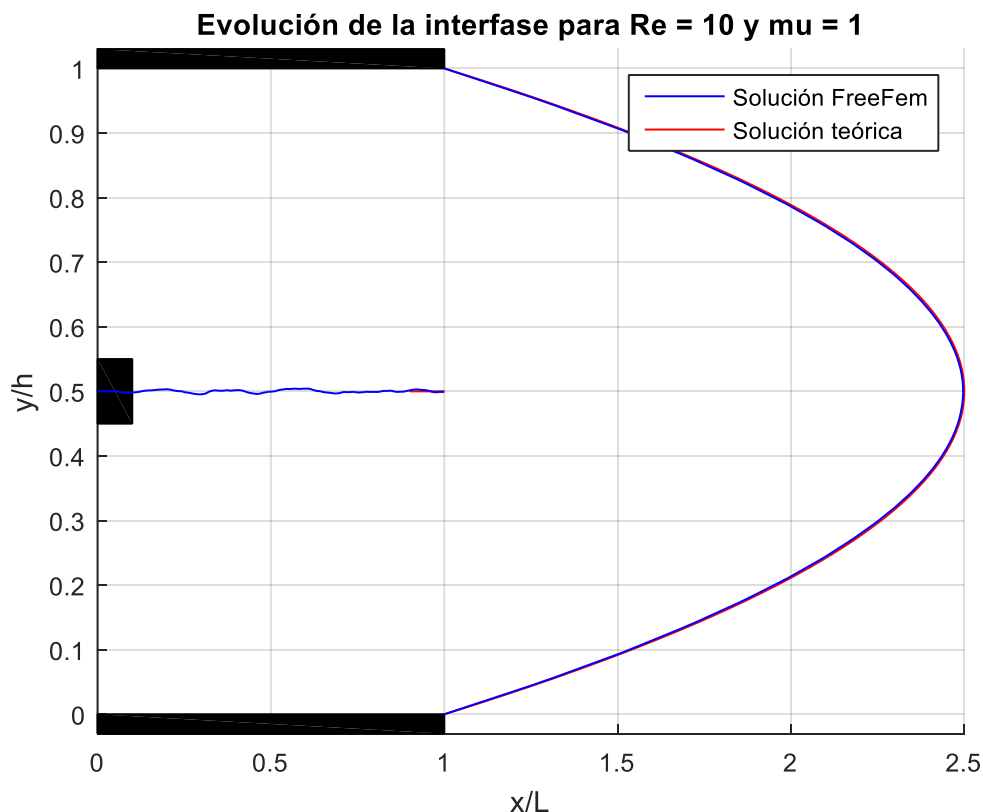


Ilustración 11: *freefem* (0.1,0.1,10,1)

Este es el ejemplo más sencillo, las viscosidades son iguales y el Reynolds es muy pequeño. Se puede ver cómo la velocidad se corresponde con la teórica, así que diremos que el flujo está completamente desarrollado a la salida de la célula. La interfase también se corresponde con la teórica y no variaba con el tiempo cuando se hizo la iteración en FreeFem++, así que diremos que la interfase es estable. Veamos otro ejemplo más complejo.

```
>> freefem(0.1,0.1,1500,0.5)
```

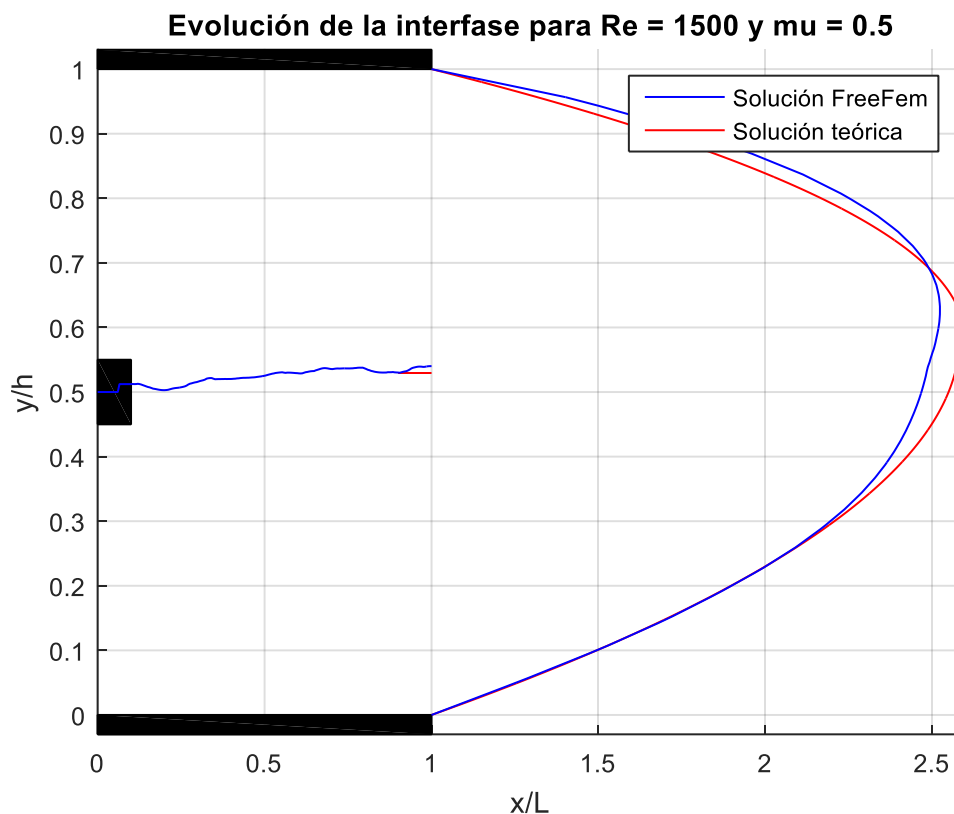


Ilustración 12: freefem (0.1,0.1,1500,0.5)

En este caso se puede ver que el flujo no está completamente desarrollado. La interfase no se corresponde con la teórica y variaba con el tiempo en la simulación, así que diremos que la interfase es inestable. Veamos un último ejemplo con cambio de geometría.

```
>> freefem(0.1,0.4,10,0.1)
```

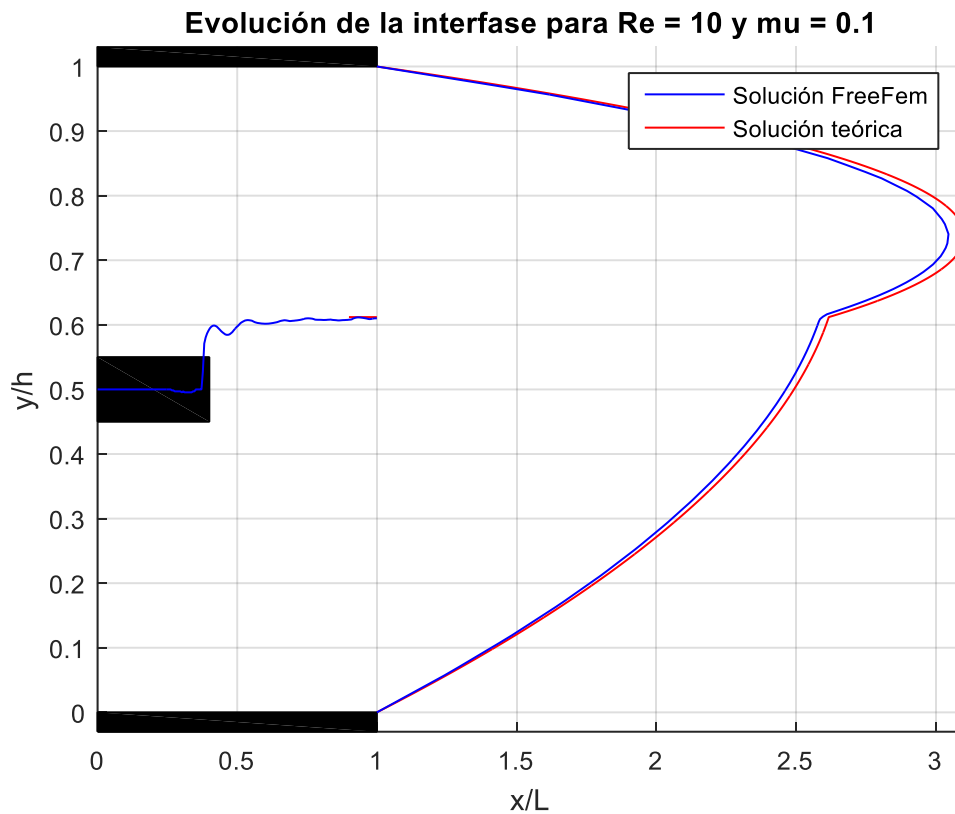


Ilustración 13: *freefem (0.1,0.4,10,0.1)*

La interfase no variaba con el tiempo y se corresponde con la teórica así que es estable. Sin embargo el flujo aún no está desarrollado.

Se ha realizado este estudio con los 68 casos descritos anteriormente. Las siguientes tablas resumen este análisis para las distintas geometrías, donde se analiza si la interfase es estable (IE) y si el flujo está completamente desarrollado a la salida (FD).

dh = 0.1 y $L_0 = 0.1$

Tabla 1: Simulaciones en FreeFem++ para $dh = 0.1$ y $L_0 = 0.1$

		Re											
		10		300		600		900		1200		1500	
		IE	FD	IE	FD	IE	FD	IE	FD	IE	FD	IE	FD
μ_2/μ_1	1	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,9	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,8	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,7	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,6	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,5	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO
	0,4	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO	NO	NO
	0,3	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO	NO	NO
	0,2	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO	NO	NO	NO
	0,1	SÍ	SÍ	SÍ	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO	NO

Se puede ver cómo a medida que disminuye la relación de viscosidades, la interfase se vuelve inestable para menores números de Reynolds.

A partir de la tabla se puede sacar el Reynolds crítico para cada relación de viscosidades. El Reynolds crítico es aquel para el que la interfase es inestable y/o el flujo no está completamente desarrollado en velocidades.

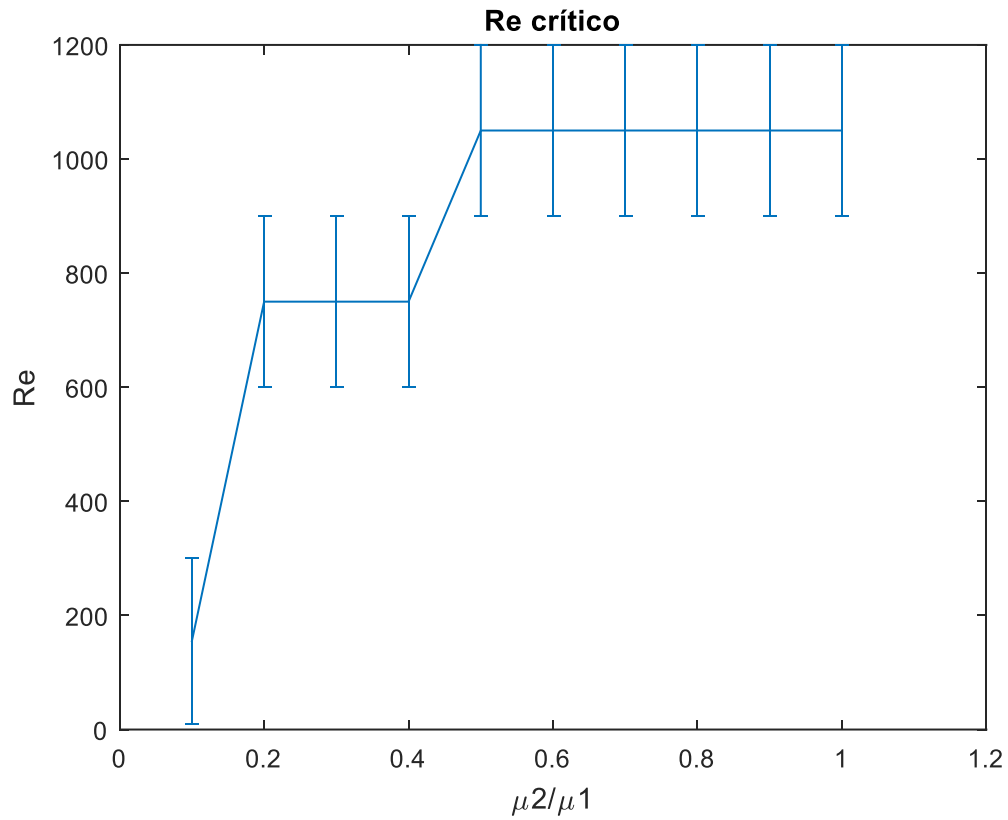


Ilustración 14: Reynolds crítico en función de la relación de viscosidades

dh = 0.4 y $L_0 = 0.1$

Tabla 2: Simulaciones en FreeFem++ para dh = 0.4 y $L_0 = 0.1$

		Re	
		10	
		IE	FD
μ_2/μ_1	1	SÍ	NO
	0,7	SÍ	NO
	0,3	SÍ	NO
	0,1	NO	NO

Al aumentar el grosor de la pared de entrada, se disminuye el área de los conductos, lo que provoca que la velocidad aumente a la entrada. Esto provocará mayores inestabilidades en la interfase y que el flujo tarde más en desarrollarse.

$dh = 0.1$ y $L_0 = 0.4$

Tabla 3: Simulaciones en FreeFem++ para $dh = 0.1$ y $L_0 = 0.4$

		Re	
		10	
		IE	FD
μ_2/μ_1	1	SÍ	SÍ
	0,7	SÍ	SÍ
	0,3	SÍ	NO
	0,1	SÍ	NO

Al aumentar la longitud de la pared de entrada, el fluido tarda más en estabilizarse ya que disminuye la longitud de la interfase, que en este caso será $1 - 0,4 = 0,6$.

6 CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Con las simulaciones en FreeFem++ se ha comprobado que las soluciones halladas en el capítulo 3 son válidas para valores de Reynolds pequeños. En el caso de tener Reynolds altos se ha visto como la interfase se vuelve inestable y/o el flujo no queda desarrollado a la salida.

El Reynolds crítico dependerá de la relación de viscosidades y será menor conforme a menores relaciones de viscosidades como se puede comprobar en la *Ilustración 18*. El error de este gráfico es de ± 150 ya que se han realizado las iteraciones de 300 en 300. Por ello, un posible trabajo futuro es realizar más simulaciones para obtener un Reynolds crítico más exacto. Cabe señalar que en este proyecto sólo se han realizado 60 simulaciones porque cada una tarda una media de 30h y no había tiempo suficiente.

Con el cambio de la geometría de entrada se ha demostrado que cuanto más delgada y más corta sea la pared, la interfase será más estable. Así que una idea a considerar sería disminuir al máximo el grosor de la pared de entrada.

Por lo tanto, para realizar el diseño de la batería habrá que tener en cuenta los análisis del capítulo 3 y los resultados de FreeFem++ para usar el Reynolds adecuado. De este modo podremos saber la posición final de la interfase para separar nuevamente los dos fluidos y llevarlos a sus respectivos tanques y repetir el proceso otra vez.

7 BIBLIOGRAFÍA

- [1] B. Türker (2014). *Modeling and Utilizing a Vanadium Redox Flow Battery for Easier Grid and Market Integration of Wind Power*. Universität Bremen.
- [2] T. Casey (2015). *UET Backs Up Energy Storage Challenge To Tesla With More Flow Battery Info*.
- [3] W. A. Braff (2014). *Membraneless Hydrogen Bromine Laminar Flow Battery for Large-Scale Energy Storage*. Massachusetts Institute of Technology.
- [4] P. Navalpotro, J. Palma, M. Anderson y R. Marcilla (2017). *A Membrane-Free Redox Flow Battery with Two Immiscible Redox Electrolytes*. IMDEA Energy Institute.
- [5] H. Bruus (2008). *Theoretical Microfluidics*. Oxford University, pp. 213-230.
- [6] B. A. Finlayson (2014). *Poiseuille Flow of Two Immiscible Fluids between Flat Plates with Applications to Microfluidics*. University of Washington.
- [7] R. B. Bird (2002). *Transport Phenomena*, second edition. Wiley, pp. 64-66.
- [8] F. Hecht (2012). *New Development in FreeFem++*. J.Numer. Math. 20, no. 3-4, 251-265. 65Y15.

8 CRONOGRAMA

Tabla 4: Cronograma del proyecto

	mar-17	abr-17	may-17	jun-17	jul-17	ago-17	sep-17	oct-17	nov-17	dic-17	ene-18	feb-18
Definición del proyecto												
Búsqueda de información												
Desarrollo de las ecuaciones												
Solución para $x = \infty$												
Código de FreeFem++												
Simulación con FreeFem++												
Resultados y conclusiones												
Redacción del proyecto												

9 PRESUPUESTO

En la siguiente tabla se muestra el desglose del presupuesto del proyecto.

Tabla 5: Presupuesto del proyecto

	Coste de mano de obra			Total
	Salario (€/h)	Horas trabajadas		
Ingeniero	12	600		7.200,00 €
	Coste del hardware			
	Precio del equipo (€)	Horas de uso	Tiempo de vida (años)	
Amortización del ordenador	700	5000	5	79,91 €
	Coste de la luz			
	Consumo (kW/h)	Horas de uso	Precio de la luz (€/kWh)	
Ordenador	0,1	5000	0,13	65,00 €
				7.344,91 €

Para el cálculo de la amortización del equipo se ha usado la siguiente formula:

$$\text{Coste amortización} = \text{Precio del equipo} * \frac{\text{Horas de uso}}{\text{Tiempo de vida (h)}}$$

10 ANEXOS

10.1 ANEXO 1. FUNCIONES EN MATLAB

10.1.1 FUNCIÓN *velocity*

```
function p2 = velocity (k,q)

%Esta función usa como inputs "k" y "q" y te devuelve el perfil de
%velocidades para un punto alejado de la entrada
p = [(1-q-k*q^2+k*q) 2*(3*q-2+k*q) 3*(2-3*q-k*q) 4*(q-1) 1];
valpha = roots(p);
ii = 1;

while ii <= length(valpha)
    if (valpha(ii)<=1) && (valpha(ii)>=0) && (imag(valpha(ii))==0)
        alpha = valpha(ii);
        break
    else
        ii = ii + 1;
    end
end

y = 0:0.001:1;
f = ((y>=0)&(y<=alpha)).*((-y.^2 + (y*(q*(alpha^2) + 1 -
alpha^2))./(q*alpha + 1 - alpha))./(-alpha^2/3 + (alpha/2)*(q*alpha^2
+ 1 - alpha^2)/(q*alpha + 1 - alpha))) +
((y>alpha)&(y<=1)).*((1/q)*((-y.^2 + (y*(q*(alpha^2) + 1 -
alpha^2))./(q*alpha + 1 - alpha)) + (q*alpha*(1-alpha) + alpha*(alpha-
1))./(q*alpha + 1 - alpha))./(-alpha^2/3 + (alpha/2)*(q*alpha^2 + 1 -
alpha^2)/(q*alpha + 1 - alpha)));
f = f + 1; %Situamos el perfil en la posicion final

figure(1)
hold on
grid on
p2 = plot (f,y,'r');
plot ([0.9 1],[alpha alpha],'r')
axis([0 inf 0 1])
title(['Perfil de velocidad para Q2/Q1 = ' num2str(k) ' y \mu2/\mu1 =
' num2str(q) ''])
xlabel('Velocidad')
ylabel('Altura')
end
```

10.1.2 FUNCIÓN *interface*

```
function y = interface (q,alpha)

%Esta función es polimórfica, es decir, realiza unas operaciones u
%otras dependiendo del número de inputs.

%Si se añaden dos inputs, serán leídos como "q" y "alpha", por ese
%orden, y devolverá un único valor que será la relación de caudales
%"k". Para este caso hay que poner un output.

%Si se mete un único input éste será leído como la relación de
%viscosidades "q" y devolverá una gráfica de la posición de la
%interfase "alpha" frente a la relación de caudales "k". En este caso
%no hay que poner ningún output.

if (nargin == 1 && nargout == 0)
    alpha = linspace (0,1,50);
    k = ((1-q)*alpha.^4 + 2*(3*q-2)*alpha.^3 + 3*(2-3*q)*alpha.^2 +
4*(q-1)*alpha + 1)./(q*(q-1)*alpha.^4 - 2*q*alpha.^3 + 3*q*alpha.^2);

    figure (1)
    hold on
    grid on
    plot (k,alpha,'r')
    axis([0 3 0.2 1])
    title(['Posición de la interfase frente a la relación entre
caudales para \mu2/\mu1 = ' num2str(q) ''])
    xlabel('Q2/Q1')
    ylabel('Posición de la interfase')

elseif (nargin == 2 && (nargout == 0 || nargout == 1))
    y = (1/q*(-(1-alpha)^3/6 - ((alpha^4 + alpha^2 - 2*alpha^3)*q -
(1-alpha)^4)/(4*(alpha*q + 1 - alpha)) + (alpha^3 + alpha -
2*alpha^2)/(2*(alpha + (1-alpha)/q)))/(-(alpha)^3/6 + ((alpha^4)*q -
(alpha^4 + alpha^2 - 2*alpha^3))/(4*(alpha*q + 1 - alpha)) + (alpha^2
- alpha^3)/(2*(alpha*q + 1 - alpha)));

else
    error 'El número de inputs y/o outputs es incorrecto.'
end
end
```


10.1.3 FUNCIÓN *pressure*

```
function y = pressure (q,alpha)

%Esta función es polimórfica, es decir, realiza unas operaciones u
%otras dependiendo del número de inputs.

%Si se meten dos inputs, serán leídos como "q" y "alpha" por ese orden
%y devolverá el valor de "gamma". Para este caso hay que poner un
%output.

%Si se mete un único input, será leído como "q" y devolverá una
%gráfica del parámetro adimensional "gamma" frente a la relación de
%caudales "k". En este caso no hay que poner ningún output.

if (nargin == 1 && nargout == 0)
    alpha = linspace (0,1,50);
    k = (1/q*(-(1-alpha).^3/6 - ((alpha.^4 + alpha.^2 - 2*alpha.^3)*q
- (1-alpha).^4)./(4*(alpha*q + 1 - alpha)) + (alpha.^3 + alpha -
2*alpha.^2)./(2*(alpha + (1-alpha)/q)))./(-(alpha).^3/6 +
((alpha.^4)*q - (alpha.^4 + alpha.^2 - 2*alpha.^3))./(4*(alpha*q + 1 -
alpha)) + (alpha.^2 - alpha.^3)./(2*(alpha*q + 1 - alpha))));
    p = 1./(-alpha.^3/6 + ((alpha.^4)*q - alpha.^2.*(1 -
alpha).^2)./(4*(alpha*q + 1 - alpha)) + (alpha.^2.*(1 -
alpha))./(2*((alpha*q) + 1 - alpha)));

    figure (1)
    hold on
    plot (k,p,'r'),grid
    axis([0 100 0 1000])
    title(['Parámetro adimensional de la presión frente a la relación
entre caudales para \mu2/\mu1 = ' num2str(q) ''])
    xlabel('Q2/Q1')
    ylabel('Parámetro adimensional de la presión')

elseif (nargin == 2 && (nargout == 0 || nargout == 1))

    y = 1./(-alpha.^3/6 + (alpha.^4/q - alpha.^2*(1 -
alpha).^2)./(4*(alpha/q + 1 - alpha)) + (alpha.^2*(1 -
alpha))./(2*((alpha/q) + 1 - alpha)));
else
    error 'El número de inputs y/o outputs es incorrecto.'
end
end
```

10.1.4 FUNCIÓN *freefem*

```
function freefem (dh,L0,Re,mu)

%Esta función lee el Excel de los resultados obtenidos con FreeFem++.
%Representa la interfase y el perfil de velocidades a la salida y los
%compara con la solución teórica vista anteriormente. Para ello llama
%a la función velocity.

filename = ['vel_Re=' num2str(Re) '_h=0.01_dh=' num2str(dh) '_L='
num2str(L0) '_mu21=' num2str(mu) '_rho21=1_Ca=0_Q2=1.xlsx'];
sheet = 1;

x = xlsread (filename,sheet,'A3:A40002');
y = xlsread (filename,sheet,'B3:B40002');
phi = xlsread (filename,sheet,'G3:G40002');
vxf = xlsread (filename,sheet,'C39803:C40002');
yvel = xlsread (filename,sheet,'B39803:B40002');

ii = 1;
jj = 1;
interfacex = zeros (1,200);
interfacey = zeros (1,200);

while ii <= 200*jj
    if phi(ii) < 0.5
        interfacex(jj) = x(ii);
        intery = [y(ii-1) y(ii)];
        interphi = [phi(ii-1) phi(ii)];

        interfacey(jj) = interp1 (interphi,intery,0.5,'linear');
        ii = 200*jj + 1;
        jj = jj + 1;
        if jj > 200
            break
        end

    else
        ii = ii + 1;
    end
end
end
```

```
%Deshacemos y adimensionalizamos con alpha en vez de h0
inter = 0;
mm = 1;
while mm <= 100
    inter = inter + interfacey(100+mm);
    mm = mm + 1;
end
inter = inter/100;
vxf = vxf*inter/0.45;

%Situamos el perfil en la posición final
vxf = vxf + 1;

p2 = velocity(1,mu);
g = 0.03;

figure (1)
hold on
grid on
squarex = [0 0 L0 L0 0];
squarey = [0.5-dh/2 0.5+dh/2 0.5+dh/2 0.5-dh/2 0.5-dh/2];
squarex1 = [0 0 1 1 0];
squarey1 = [-g 0 0 -g -g];
squarex2 = [0 0 1 1 0];
squarey2 = [1 1+g 1+g 1 1];
fill(squarex1,squarey1,'k')
fill(squarex2,squarey2,'k')
fill(squarex,squarey,'k')
plot (interfacex,interfacey,'b')
axis([0 inf -g 1+g])
title(['Evolución de la interfase para Re = ' num2str(Re) ' y mu = '
num2str(mu) ''])
xlabel('x/L')
ylabel('y/h')
p1 = plot(vxf,yvel,'b');
legend([p1 p2], 'Solución FreeFem', 'Solución teórica')
end
```

10.2 ANEXO 2. CÓDIGO FREEFEM++

10.2.1 ARCHIVO *batteries_convectCHNS*

// Aquí se encuentra el mallado, las ecuaciones y los algoritmos para resolverlas

```
//macro definitions
macro Grad(u) [dx(u), dy(u)] //EOM
macro Div(u,v) (dx(u) + dy(v)) //EOM
macro Normal [N.x, N.y] //EOM

include "parameters.edp";

mesh Th;
if (anew==1){
  cout << "beta=" << beta << "      ss=" << ss << "
  alfa=" << alfa << endl;
  alfa=0;
  border c1(t=0,1){x=((beta+2*alfa)*ss^((t-alfa)/(1-alfa))-
beta+2*alfa)/((2*alfa+1)*(1+ss^((t-alfa)/(1-alfa)))));
y=0;label=1;}
  alfa=0.5;
  border c2(t=0,1){x=1; y=((betay+2*alfa)*ssy^((t-alfa)/(1-
alfa))-betay+2*alfa)/((2*alfa+1)*(1+ssy^((t-alfa)/(1-
alfa)))));label=2;}
  alfa=0.995;
  border c3(t=1,0){x=((beta+2*alfa)*ss^((t-alfa)/(1-alfa))-
beta+2*alfa)/((2*alfa+1)*(1+ss^((t-alfa)/(1-alfa)))));
y=1;label=3;}
  alfa=0.5;
  border c4(t=1,h0+dh){x=0; y=t;label=4;}
  border c5(t=0,1){x=t*L; y=h0+dh;label=5;}
  border c6(t=1,0){x=L; y=(t-1)*dh+(h0+dh);label=6;}
  border c7(t=1,0){x=(t-1)*L+L; y=h0;label=7;}
  border c8(t=h0,0){x=0; y=t;label=8;}
  int nn=65;

Th=buildmesh(c1(nn)+c2(nn)+c3(nn)+c4(nn)+c5(nn)+c6(nn)+c7(nn)+c8
(nn));
}
else{
  Th=readmesh("Mesh_Re="+Reold+"_Q2="+Q20+".msh");
}
```

```

plot(Th);
fespace Uh(Th, P1b);
fespace Vh(Th, P1);
fespace Wh(Th, P2);
Uh u, du, du1, v, dv, du2, uold, uold2, vold, vold2, uh,
vh, omega;
Uh psi, psih;
Vh p, dp, ph;
Wh phi, phih, phiold, phiold2, zz, wh, dphi, dzz;
Wh rho, rhoold, mu;
Uh h1=hTriangle;
real eps= h1[].min; //min size of a mesh triangle

// Function definitions
real pi=4*atan(1);
cout << pi << " " << eps << " " << endl;
func prof2=6.0*Q2*h0/(1-H)^3*(-y^2+(1+H)*y-H);
func prof1=6.0*y/h0*(1-y/h0);
func profpsi2=6.0*Q2*h0/(1-H)^3*(-y^3/3+(1+H)*y-H);
func profpsi1=6.0*(y^2/2/h0-y^3/3/h0^2);
func heaviside=0.5*(1+tanh((phi/0.01)/1e-3));
func delta=1.0/(2*eps)*(1+cos(pi*phi/eps));

/*problem NSunsteady ([u1,u2,p],[u1h, u2h, ph]) =
  int2d(Th) (1.5*rho*Re*rdt*( h*u1*u1h + h^3*u2*u2h))
// unsteady terms x
  -int2d(Th) (2. *rho*Re*rdt*( h*u1old*u1h + h^3*u2old*u2h))
  +int2d(Th) (0.5*rho*Re*rdt*( h*u1old2*u1h + h^3*u2old2*u2h))
  +int2d(Th) (u1h*rho*Re*h* (u1old*dx(u1)+u2old*dy(u1)) -
dx(u1h)*p // convective terms x + p
  +u2h*rho*Re*h^3*(u1old*dx(u2)+u2old*dy(u2)) -
dy(u2h)*p) // convective terms y + p
  +int2d(Th) (mu*h0*(h^2*dx(u1h)*dx(u1)+ dy(u1h)*dy(u1))
// viscous x
  + (mu*h0*(h^4*dx(u2h)*dx(u2)+h^2*dy(u2h)*dy(u2)))
  +int2d(Th) ((dx(u1)+dy(u2))*ph+0.000001*p*ph)
// continuity equation // viscous y
  + on(1,3,5,6,7,u1=0,u2=0) +
on(4,u1=prof2,u2=0)+on(8,u1=prof1,u2=0);
*/

// Problem definition
problem poissonPsi(psi,psih)=
  int2d(Th) ((dx(psi)*dx(psih)+dy(psi)*dy(psih)))
  - int2d(Th) (omega*psih)
  + on(1,psi=0)

```

```

problem CHM1unsteady([phi,zz],[phih,wh])=
    int2d(Th) (1.5*phi*phih/dt)
    +int2d(Th) ((-2*phiold+0.5*phiold2)*phih/dt) // Gammahn-
Hilliard equation
    +int2d(Th) (phih*(u*dx(phi)+v*dy(phi)))
    +int2d(Th) ((1.0/Pe)*M*Grad(zz)'*Grad(phih)) //'
    +int2d(Th) (-zz*wh)
    +int2d(Th) (energyB*Grad(phi)'*Grad(wh)) //'
    -int2d(Th) (energyA* wh * 2 * phiold*phiold*phiold)
    +int2d(Th) (energyA* wh * 3 * phiold*phiold*phi)
    -int2d(Th) (energyA* wh * 3 * phiold*phi)
    +int2d(Th) (energyA* wh * 1.5* phiold*phiold)
    +int2d(Th) (energyA* wh * 0.5* phi);

problem NSunsteady ([u,v,p],[uh, vh, ph]) =
    int2d(Th) (1.5*rho*Re*rdt*( h*u*uh      + h^3*v*vh))
// unsteady terms x
    -int2d(Th) (2. *rho*Re*rdt*( h*uold*uh  + h^3*vold*vh))
    +int2d(Th) (0.5*rho*Re*rdt*( h*uold2*uh + h^3*vold2*vh))
    +int2d(Th) (uh*rho*Re*h* (uold*dx(u)+vold*dy(u)) - dx(uh)*p
// convective terms x + p
        +vh*rho*Re*h^3*(uold*dx(v)+vold*dy(v)) - dy(vh)*p)
// convective terms y + p
    +int2d(Th) (mu*h0*(h^2*dx(uh)*dx(u)+      dy(uh)*dy(u))
// viscous x
        + (mu*h0*(h^4*dx(vh)*dx(v)+h^2*dy(vh)*dy(v))))
    +int2d(Th) ((dx(u)+dy(v))*ph+0.000001*p*ph)
// continuity equation // viscous y
    + on(1,3,5,6,7,u=0,v=0) + on(4,u=prof2,v=0)+on(8,u=prof1,v=0);

problem NavierStokesconvect([u, v, p], [uh, vh, ph]) =
    int2d(Th) (rho*Re*h*u*uh / dt)
    - int2d(Th) (rho*Re*h*convect([uold,vold], -dt, uold)*uh/dt)
    +int2d(Th) (mu*h0*(h^2*dx(u)*dx(uh)+dy(u)*dy(uh)))
    -int2d(Th) (p*dx(uh))
    + int2d(Th) (rho*Re*h^3*v*vh/dt)
    - int2d(Th) (rho*Re*h^3*convect([uold,vold], -dt, vold)*vh/dt)
    +int2d(Th) (mu*h0*(h^4*dx(v)*dx(vh)+h^2*dy(v)*dy(vh)))
    -int2d(Th) (p*dy(vh))
    +int2d(Th) ((dx(u)+dy(v))*ph+0.000001*p*ph)
    + on(1,3,5,6,7,u=0,v=0) + on(4,u=prof2,v=0)+on(8,u=prof1,v=0);

```

```
// Initialisation
verbosity=0;

// initializing
//plot(Th);
if (anew==1){
    u = prof2*(y>(h0+dh/2))+prof1*(y<(h0+dh/2)); uold = u;
uold2=u;
    v = 0.0; vold = v; vold2=v;
    /// Initial location of the interface. Phi is defined as
    the signed distance to the interface,
    // Phi > 1/2 for fluid 2, phi<1/2 for fluid 1 and phi=1/2
    at the interphase.
    func f=(y-(h0+dh/2));
    phi = 0*(f>0)+1*(f<0);
}
else{
    {ifstream file("u1_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>u[];}
    {ifstream file("u2_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>v[];}
    {ifstream
file("u1old_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>uold[];}
    {ifstream
file("u2old_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>vold[];}
    {ifstream
file("u1old2_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>uold2[];}
    {ifstream
file("u2old2_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>vold2[];}
    {ifstream file("p_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>p[];}
    {ifstream
file("phi_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>phi[];}
    {ifstream
file("phiold_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>phiold[];}
    {ifstream
file("phiold2_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>phiold2[];}
    {ifstream file("z_Re_"+Reold+"_mu_"+mu2old+"_Q2_"+Q2+".txt");
file>>zz[];}
```

```
}
M=1;

Th = adaptmesh (Th,phi ,err=0.0625,absererror=1,nbjacoby=2,
omega=1.8,ratio=1.1, nbsmooth=3,splitpbedge=1,
maxsubdiv=3,rescaling=1,hmax=0.1,hmin=0.01) ;
u=u;v=v;phi=phi;p=p;zz=zz;
phiold=phiold; uold=uold;p=p;vold=vold;
phiold2=phiold2; uold2=uold2;vold2=vold2;
savemesh(Th,"Mesh_Re="+Re+"_Q2="+Q2+".msh");

plot(Th,phi,value=1);
uold2=uold; uold = u;
vold2=vold; vold = v;
phiold2=phiold;phiold= phi;

cout<<"-----
-----"<< endl;
cout<<"-----
-----"<< endl;
cout<<"Q2="<<Q2<< endl;
cout<<"-----
-----"<< endl;
cout<<"-----
-----"<< endl;
real damping=1;
int itsave=1;

for (int it=0; it<150000; it++) {
    // First , convect density

    uold2=uold;vold2=vold;phiold2=phiold;
    uold=u;vold=v;phiold=phi;
    CHM1unsteady;
    rho = 1.0*phi+rho2*(1-phi);
    mu = 1.0*phi+mu2*(1-phi);

    NSunsteady;

    du1=(u-uold);
    du2=(v-vold);
    error=du1[].linfty/u[].linfty+du2[].linfty/v[].linfty;
    cout << "    error="<< error << "    t=" << it*dt << endl;
```



```
        if(error<1e-9)break;

        cout << "pmin, pmax = " << p[].min << " " << p[].max <<
endl;
        cout << "phimin, phimax = " << phi[].min << " " <<
phi[].max << endl;
        plot(Th,phi, fill=0, value=1);

        if ((it % 10)==0){
            Th = adaptmesh (Th,phi
, err=0.0625, abserror=1, nbjacobian=2, omega=1.8, ratio=1.1,
nbsmooth=3, splitpbedge=1,
maxsubdiv=3, rescaling=1, hmax=0.1, hmin=0.007) ;
            u=u;v=v;phi=phi;p=p;zz=zz;
            phiold=phiold; uold=uold;p=p;vold=vold;
            phiold2=phiold2; uold2=uold2;vold2=vold2;
            savemesh(Th, "Mesh_Re="+Re+"_Q2="+Q2+".msh");

            include "savingfiles_nonsim.edp"
            cout << "-----"<< endl;
            cout << "mu2/mu1=" << mu2 << " " << "Q2/Q1=" << Q2
<< " " << "rho2/rho1=" << rho2 << endl;
            cout << "error=" << error << " " << "iteration n="
<< it << endl;
            cout << "-----"<< endl;
            itsave=itsave+1;
        }
    }
```

10.2.2 ARCHIVO *savingfiles_nonsim*

//Este archivo escribe los datos por pantalla y los guarda en archivos de texto.

```
cout << " -----" << endl;
cout << "Writting files" << endl;
cout << "-----" << endl;
cout << "-----"<< endl;
cout << "mu2/mu1=" << mu2 << " " << "h0=" << h0 << " " <<
"rho2/rho1=" << rho2 << endl;
cout << "error=" << error << " " << "time t=" << it*dt <<
endl;
cout << "-----" << endl;

ofstream file("file_Q="+Q2+"_"+1.0*itsave+".txt");
omega=dx(v)-dy(u);
poissonPsi;

int NX=200,NY=200;
real tau=6,B; // point clustering parameters for the
structure mesh
real yy,min,ymin;

file << NX << " " << NY << endl;
file << mu2 << " " << Q2 << " " << rho2 << " " << L << " " <<
" " << Re << " " << h0 << " " << dh << " " << it*dt << endl;
for (int i=0;i<NX;i++)
{
    real xx=1.0*i/(NX-1);
    min=1;ymin=0.5;
    /*for (int kk=0;kk<NY;kk++){
        yy=1.0*kk/(NY-1);
        if (abs(phi(xx,yy)-0.5)<min) {min=abs(phi(xx,yy)-0.5);
ymin=yy;} //finding interface
    }
    */
    B=1./(2*tau)*log((1+(exp(tau)-1)*ymin)/(1+(exp(-tau)-1)*ymin)); //defining the structures grid with more points at
the interface
    for (int j=0;j<NY;j++)
    {
        yy=1.0*j/(NY-1);
```

```
        yy=ymin*(1+sinh(tau*(yy-B))/sinh(tau*B)); //
Fletcher, Tanenhil, Anderson, pag 337, "Computational fluid
mechanics and heat transfer"
        file << xx          <<" " << yy          <<" " << u(xx,yy)
<<" " <<
                v(xx,yy) <<" " << p(xx,yy) <<" " << psi(xx,yy)
<<" " <<
                phi(xx,yy) <<" " << rho(xx,yy) <<" " << mu(xx,yy)
<<" " << endl;
    }
}

{ofstream file("u1_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<u[];
}
{ofstream file("u2_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<v[];
}
{ofstream file("u1old_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<uold[];
}
{ofstream file("u2old_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<vold[];
}
{ofstream file("u1old2_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<uold2[];
}
{ofstream file("u2old2_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<vold2[];
}
{ofstream file("p_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<p[];
}
{ofstream file("phi_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<phi[];
}
{ofstream file("phiold_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<phiold[];
}
{ofstream
file("phiold2_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<phiold2[];
}
{ofstream file("z_Re_"+Re+"_mu_"+mu2+"_Q2_"+Q2+".txt");
  file<<zz[];
}
```

10.2.3 ARCHIVO *parameters*

// Aquí se encuentran los datos del problema, este es el archivo que modificamos para crear un nuevo caso de estudio.

```
real rho2=1, mu2=1; // fluid parameters
real Re=10;
real Reold=10;
real mu2old=1;
real error=0,err=0,err2=0; //errors of the steady and unsteady
calculations
real Q2=1,h=0.01,L=0.1,dh=0.1,h0=0.5-dh/2; //geometrical
parameters
real Q20=1;
real beta=2,ss=(beta+1)/(beta-1),alfa=0.5; // grid parameters
real betay=2, ssy=(betay+1)/(betay-1),alfay=0.1;
real H=h0+dh;
real time=0,dt=5e-5,rdt=1.0/dt;
real eps1=0.001; //small parameter avoiding division by zero in
the normal computation
real eps2=0.001; //regularization parameter for the velocity
real Ca=0; // inverse capillary number
int anew=0; // 0-> from previous solution
           // 1-> new solution
// Cahn-Hilliard parameters
real M=1; // Constant Mobility
real Cn = 0.001;
real Pe = 1/Cn;
func energyA = 6*sqrt(2)/Cn;
func energyB = 6*sqrt(2)*Cn;
```